

Pusztai Tamás:
A polikristályos megszilárdulás fázismező modellje – nukleáció és növekedés.
c. MTA doktora címért benyújtott munkájáról.

A munka szépen elkészített, hibákat szinte nem tartalmaz. Formailag megfelel a követelményeknek.

Közlemény adatok:

Saját közlemények száma: 83

Idézetek száma: 1 965

Független idézetek száma: 1 535

Összegzett impakt faktor: 152,764

Várható IF-ek összege: 31,980

Összesen: 184,744

A disszertációval kapcsolatos megjegyzések:

Bevezetés

Ebben a fejezetben röviden bemutatásra kerül a dolgozat témaköre és annak a dolgozat témáját érintő terminológiája. A fejezet hasznosan járul hozzá a dolgozat további megértéséhez. Annyit azonban már itt megjegyzek, hogy a fogalmazás egy kicsit a szakterület bennfenteseinek szól, nekem, mint csak közeli és kísérleti területen dolgozónak néha a fogalmak használata kicsit idegen.

Mi a cellás növekedés morfológiája?

A Fázismező modell alapjai

A 4. ábrán a folyadék kristály határátmenet leírására (néhány atomnyi vastag) folytonos átmenetet ábrázol. Van kísérleti bizonyítéka ennek az átmenetnek, vagy ez feltételezés? Miért nem lépcső jellegű átmenetet használ atomi szinten? A kristályok atomrétegenkénti növekedésével nem ez lenne jobban összhangban?

Csíráépződés

A 30. oldal utolsó sorában: úgy tudtam, hogy kT az átlagos energia (nem a fluktuációké).

A 40. oldalon (első sor) találtam egy betűhibát: „az klasszikus”, helyesen „a klasszikus”. Ugyanez a hiba előfordul a 41. oldalon a 9. ábra szövegében („az numerikus”).

Növekedés

Az 51. oldalon a 14. ábrához fűzött értelmezésben több dolog keveredik, és ez is mutatja a dolgozatnak a kísérleti eredményekhez való kissé ambivalens viszonyát. A 14b. ábrán bemutatott „dendrit” növekedéséhez fűzött magyarázat nem konzekvens. Szennyezőről beszél, de itt a szennyezőnek saját felülete van. Felülete fázisnak, idegen testnek van. Tehát a növekedő „dendrit” útjába kerülő anyag-részecskék nem szennyezők, hanem egy második fázis részecskéi, így növekedést egy kétfázisú rendszerben kell leírni. A második fázis hatását lényegében helyesen látja a szerző: a második fázis részecskéi akadályozzák a kialakult kristály növekedését. Erre a kristálynak két választása lehet: vagy másik irányban tovább nő

(az orientáció nem változik, hiszen az egykristály megmarad), vagy nem nő tovább. Az utóbbi esetben az idegen részecske felületén egy új kristály(mag) képződik és növekedik, tetszőleges vagy a második fázis kristályszerkezete által stimulált orientációval. Az eredmény: polikristály alakul ki. Lényegében ez látszik a 14b. ábrán is, ahol egy dendritekből álló polikristályt látunk. Ezt alátámasztja a 15. ábra alsó sorának orientációs térképe is, ott is polikristály nőtt (a szerző szerint is), és én nem is javasolnám ezt a képződményt dendritnek nevezni, a dendrit ugyanis egykristály. Amit a 15. ábra orientációs térképén látunk az egy dendritkristályokból felépülő szferolit. Szferolit a 14b. ábrán látható képződmény is.

A 15. ábrához fűződik egy kérdésem is. Mi az oka annak, hogy a felső sorban mutatott dendrit szerkezete „balcsavarra” emlékeztet? Azaz, mi az oka, hogy mind a négy központból induló ág elágazásai egyformán aszimmetrikusak, a növekedés irányában balra sokkal nagyobb ágak nőnek ki, mint jobbra?

A 16. és 17 ábrák eredménye igazán nem meggyőző. Azt eddig is mindenki tudta, hogy a kicsi akadályokat a szerkezet körbenövi, és zárványokká válnak, a nagyok pedig blokkolhatják a növekedést, és új kristályok indítását eredményezhetik. A 16. ábra leírásánál azt találjuk, hogy a „nagy méret” a dendritcsúcs sugarának kb. a negyede fölött van. Ennek így nehéz a fizikai értelmét kihámozni, itt elkerülhetetlen az atomi növekedési mechanizmus bekapcsolása és azt kellene megnézni, hogy a csúcson mekkora az a sík felület, ahol a kétdimenziós növekedés zajlik. Ha ezt lefedi az idegen fázis, akkor a növekedés megakadhat. A lezáró fázis ahhoz is elég nagy kell, hogy legyen, hogy rajta új mag képződhessen és nőhessen tovább azaz, a nagy „szennyező” méretét a kritikus mag méretéhez kellene hasonlítani (heterogén magképződésnél a szükséges kontaktus-felület méretéhez). Ez lényegében a 18. ábrát is érinti. A pixelekből megadott távolságot nem tudom összevetni a kritikus méretekkel. A méreteknek egyébként itt fizikai jelentése lenne, mondjuk nm-ben. A 16-18. ábrákon az eltérő szín ugye eltérő orientációt jelent?

Az 54. oldal utolsó bekezdésében elkezdett összefoglalás megfogalmazása kissé zavaró: Az új mag képződését nem a dendritcsúcs és az idegen részecske kölcsönhatása okozza. Annak a következménye a dendritcsúcs növekedésének a leállása. Az oldat (olvadék) és az idegen részecske kölcsönhatásából keletkezik az új kristály, ami tovább nő az idegen részecske (szimuláció) által megszabott irányban (gondolom, bár ez sehol nem derül ki). (Itt jut eszembe: miért is nem adta meg az orientációs mezőt és a szimulációban keletkező orientációs eltérést. Ezek azonosak? Igaz, a 16-18 ábrák azt sugallják, hogy igen.)

Lehet-e tiszta polikristályos szferolitot növesztetni, ha a forgási szabadsági fok nem játszik szerepet?

A forgási szabadságfok csökkentésével az is a problémám, hogy ha az fontos és befagyasztjuk, akkor nem fog kristály növekedni, hanem amorf állapotnak kellene létrejönnie. Ha a rossz molekula-orientációk ritkák, akkor viszont nem lesz belőlük kritikus mag méretű kristály a már növekvő felületen, vagy zárványként elhálnak. Mi erről a véleménye?

A 21. ábrával kapcsolatban nem értem, hogy ha a szimuláció mérete $500 \times 500 = 250000$ pixel, hogyan lehetett ebbe 800000 pixel idegen testet beletenni (adat az ábrafeliratban)?

A 61. oldalon induló Szferolitok c. fejezet nagyon tetszett, az egy vagy több mellékminimumot mutató szemcsehatár energiáknak, mint az orientációkülönbség függvényének a hatása a morfológiára meglepően termékenynek bizonyult, pedig nagyon is kézenfekvő pl. az ikerhatárok megjelenése miatt. Egy megjegyzés és egy kérdés: A csúcson nincs elágazás csak az oldalsó felületeken, a csúcs növekedési iránya legfeljebb megtörik. Miért különbözik olyan jelentősen az elágazások sűrűsége a 27. ábra egyes szimulációi között?

Háromdimenziós polikristályos fázismező modell

Komoly eredmény, hogy a számítások 3D-ben is ugyanúgy működnek, mint 2D-ban. Itt is, azonban, felmerülnek bizonyos mennyiségi problémák, pl. a kristálméreték kérdése és a szerkezet jellegének meghatározása abban az értelemben, hogy a „szennyezők” bevitele itt is második fázist jelent, és ennek aránya nagy. Pl. a 35. ábrán bemutatott morfológiák esetében a 64×10^6 voxelből 20×10^6 voxel az idegen fázis (kb 30 térfogat%), tehát egy kompozit anyagról van szó, aminek a térfogatban is látszania kellene. Ha minden szennyező legalább egy új kristályt jelent, egy szennyező szemcsére egy ≈ 3 szoros térfogatú szemcse jut. Ennek mérete kb. $3^{1/3}$ voxel, azaz a szemcsék és a szennyező idegen anyag szemcséinek mérete alig különbözne. Végül is mekkorák a szemcsék a szennyező zárványokhoz képest?

TÉZISEK

Az 1, 4, 5, és 6. tézispontokat új tudományos eredményként elfogadom.

A 2. tézisponttal kapcsolatban megjegyzem, hogy a kissé bombasztikus terminológiákkal mint „szédelgő dendrit”, „orientációs pinning centrum” nem sokat tudtam kezdeni. A „szédelgő dendritek” szerintem szferolitok. Az „orientációs pinning centrumok” pedig idegen részecskék, illetve ezek hatásának leírására szolgáló modell elemek. Ettől eltekintve, ezen szferolitok keletkezési mechanizmusának pontosítása is szükséges szerintem. Az új orientáció nem a dendritesúcs és a részecske kölcsönhatásaként jön létre – mint a tézispont állítja-, hanem a részecskén végbemenő random (pl. amorf szemcsén) vagy irányított (epitaxiás) magképződés eredményeképpen. Ebből a szempontból mindegy, hogy a részecske hol található. Ha éppen a dendritesúcsra helyezzük (kerül), akkor megállíthatja a meglévő kristály növekedését és onnan egy újat indíthat.

A 3. tézisponttal kapcsolatban azt gondolom, hogy a leírt jelenség csak nagy molekulájú anyagok kristályosodásakor játszhat szerepet (pl. szerves molekulák). Szerintem ennek a megszorításnak szerepelnie kell a tézisben.

A fenti megszorításokkal elfogadom a 2. és 3. tézispontot is.

Összefoglalva a fentieket Pusztai Tamás MTA doktori értekezése érdekes, gondosan megszerkesztett munka, megfelelő mennyiségű és minőségű tudományos eredményt tartalmaz. Ennek alapján javaslom az értekezés nyilvános vitára való kitűzését és sikeres védelem esetén az MTA doktora cím odaítélését.

Budapest, 2014. ápr. 12.

Radnóczy György
Az MTA doktora